完全正写像が課す物理的制約について : 2次元系Lindblad型マスター方程式の場合(第10回『非平衡系の統計物理』シンポジウム,研究会報告)

木村, 元

Physical Restrictions imposed by a Completely Positive Map

- The Case of 2-level Completely Positive Dynamical Semigroup (Lindblad Type Master Equation) -

早稲田大学 理工学研究科　木村 元*1

1 序論

量子力学は, 多くの微視的現象を統一的に説明することに成功し, 現在ではミクロな基礎理論としての地位を確立している. 一方で, その生誕以来問題となっている, 観測問題等の困難を抱えていることも事実である: つまり, 量子ダイナミクスが Schrödinger 方程式等に基づくユニタリー性を備えているために, 熱平衡化や非干渉化等の非ユニタリー発展を説明することが困難となる問題である. このことを説明する有力な考え方の一つとして, 例えば Reduced Dynamics が挙げられる [1,2]. すなわち, 対象とする系が孤立系でないものと考え, それと相互作用する環境系 (熱浴) の存在を考慮に入れる方法である. 量子論は全体系— 対象系 + 環境系 —に適用され, 対象系のダイナミクスが改めて抽出される [3]. 対象系と環境系の相関が生じることにより, 対象系の状態は非ユニタリー発展を行い得る. 例えば電磁場中 (環境系) の原子 (対象系) の散逸現象等を扱う量子光学では, 実験との整合性もあり, その正当性が高められている. しかしながら, Reduced Dynamics が全ての非ユニタリー発展を説明するかどうかは非自明な問題であろう. 特に観測問題に関しては, Reduced Dynamics を用いる方法以外の多くの理論も提案されており, 万人の意見が一致することはない.

このような背景のもと, 本研究では「非ユニタリー発展の基礎付けとして Reduced Dynamics が万能なものとなり得るか」という点を検証することを目的とする. そのため通常よく行なわれるように, ハミルトニアンを設定する等の具体的モデルを立てず, Reduced Dynamics の時間発展演算子の集合を用いた統一的な議論を展開したい. これを可能とするのが本研究のキーワードである, 「Complete Positivity(以後, 完全正値性)」または「Completely Positive Dynamical Semigroup(以後, 完全正値力学的半群)」である: Kraus は, Reduced Dynamics によって導出される時間発展演算子には完全正値性 [4] と呼ばれる強い性質が課せられることを指摘した [5]. すなわち, 完全正値性は Reduced Dynamics の一般的特性と考えられる. そこで, もし仮に完全正値性が実験によって検証可能な制約を生み出せば, Reduced Dynamics という方法論に対する実験的検証を行なうことが可能となるであろう. 事実現在までに, 完全正値性が物理量の時間発展に制約を与えるほどに強い条件であることが, 幾つかのモデルや条件付きの議論によって示唆されている [2]. これまでに最も一般的な議論として, 2 準位系完全正値力学的半群の枠組みにおいて Gorini, Kossakowski,

*1 Email address: gen@hep.phys.waseda.ac.jp

Sudarshan によってなされたものがある [6]. 彼らは, 量子 Markov 過程を一般的に記述する力学的半群 (Dynamical Semigroup) [7] に, 完全正値性を課した完全正値力学的半群に基づく議論を展開し, ある条件の下では 2 準位系の緩和時間にある制約が課せられることを示した. 本稿では, まず始めに彼らの結論が 2 準位系完全正値力学的半群全体に拡張可能であること (つまり, 緩和時間への制約が 2 準位完全正値力学的半群における普遍則であること) を示し, その後この結果が Reduced Dynamics に対する実験検証となり得るかを議論する.

2 2 準位系完全正値力学的半群と緩和時間への制約

Lindblad [8], または Gorini *et al.* [6] によって独立に完全正値力学的半群のマスター方程式の表現定理が与えられた. これが現在 Lindblad 型マスター方程式として広く知られているものである. 本稿で興味のある 2 準位系の場合は

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = (\mathcal{H}+\mathcal{D})\rho(t), \quad \mathcal{H}\rho = -i[H,\rho], \quad \mathcal{D}\rho = \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}\{[\sigma_i, \rho\sigma_j] + [\sigma_i\rho, \sigma_j]\} \tag{1}$$

と表すことができる [9]. ここで, $\rho(t)$ は時刻 t における密度行列, H は $\operatorname{tr} H = 0$ を満たす自己共役な演算子 (対象系の有効ハミルトニアン), σ_i $(i = 1,2,3)$ は Pauli 演算子, $[C_{ij}]$ は正値な複素行列である. 完全正値性条件は複素行列 $[C_{ij}]$ の正値性に反映されていることを強調しておく. これを $H = \sum_i h_i\sigma_i$, $C_{ij} = (\gamma - 2\gamma_i)\delta_{ij} + i\sum_k \epsilon_{ijk}a_k$(ただし, $\gamma \equiv \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3$) と実パラメータ h_i, γ_i, $a_i \in \mathbb{R}$ $(i = 1,2,3)$ を用いて表現し [10], 3 つの偏極成分 $M_i(t) = \operatorname{tr}\rho(t)\sigma_i/2$ $(i = 1,2,3)$ に対する一階の 3 元連立微分方程式 (一般化された Bloch 方程式) に書き直すと

$$\frac{d}{dt}M_i(t) = -\sum_{j=1}^{3} A_{ij}M_i(t) + \frac{a_i}{2}, \ [A_{ij}] = \begin{pmatrix} \gamma_1 & h_3 & -h_2 \\ -h_3 & \gamma_2 & h_1 \\ h_2 & -h_1 & \gamma_3 \end{pmatrix} \tag{2}$$

となる [11]. ここで複素行列 $[C_{ij}]$ が正値行列であるために, その対角成分が正値であること: $C_{ii} = \gamma - 2\gamma_i \geq 0$ $(i = 1,2,3)$, つまり

$$\gamma_1 + \gamma_2 \geq \gamma_3, \quad \gamma_2 + \gamma_3 \geq \gamma_1, \quad \gamma_3 + \gamma_1 \geq \gamma_2 \tag{3}$$

が成立していることに注意されたい.

緩和時間 T_i $(i = 1,2,3)$ は, 緩和の時間スケールを与えるように式 (2) の行列 $[A_{ij}]$ の固有値 λ_i $(i = 1,2,3)$ の実部の逆数によって定義される: $T_i \equiv 1/\Gamma_i \equiv 1/\operatorname{Re}\lambda_i$ $(i = 1,2,3)$. Γ_i は緩和定数 (又は逆緩和時間) と呼ばれるもので, 以降本稿で着目する物理量とする.

Gorini *et al.* はマスター方程式 (1) の超演算子 $\mathcal{H}$ と $\mathcal{D}$ が可換な場合, つまり

$$[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0 \tag{4}$$

を満たすときに, パラメータ γ_i が緩和定数 Γ_i になること (つまり, γ_i が行列 $[A_{ij}]$ の固有値の実部になること) を示し, 次の定理を得た.

定理 1 Gorini *et al.* による緩和定数に関する定理 [6]
条件 $[\mathcal{H}, \mathcal{D}] = 0$ を満たす 2 準位完全正値力学的半群において, 緩和定数 Γ_i $(i = 1, 2, 3)$ の間に以下の制約が課せられる:

$$\Gamma_1 + \Gamma_2 \geq \Gamma_3, \quad \Gamma_2 + \Gamma_3 \geq \Gamma_1, \quad \Gamma_3 + \Gamma_1 \geq \Gamma_2. \tag{5}$$

これは, 条件 (4) から得られる $\gamma_i = \Gamma_i$ を完全正値性から課せられる式 (3) に代入して得られる.

しかしながら最近, 強結合系を扱った具体的な (2 準位系完全正値力学的半群の) モデルの解析により, 条件 (4) が成立しないのに, 緩和定数への制約 (5) が成立する系が見つかった [12]. この結果は, この制約が 2 準位系完全正値力学的半群においてより広い部分で成立していることを示している. それではどの程度広い領域で成立するかが問題となるが, 本研究により 2 準位系完全正値力学的半群全てにおいて成立する制約であることが明らかになった:

定理 2 一般化された緩和定数に関する定理 [13]
全ての 2 準位完全正値力学的半群において, 緩和定数 Γ_i $(i = 1, 2, 3)$ の間に以下の制約が課せられる:

$$\Gamma_1 + \Gamma_2 \geq \Gamma_3, \quad \Gamma_2 + \Gamma_3 \geq \Gamma_1, \quad \Gamma_3 + \Gamma_1 \geq \Gamma_2. \tag{6}$$

これは, 次の補題 [13] に基づいて証明される:

補題 1 3×3 実行列 A の固有値 λ_i $(i = 1, 2, 3)$ の実部が非負 $\mathrm{Re}\,\lambda_i \geq 0$ $(i = 1, 2, 3)$ であるとき, 不等式

$$\mathrm{Re}\,\lambda_1 + \mathrm{Re}\,\lambda_2 \geq \mathrm{Re}\,\lambda_3 \geq 0,\ \mathrm{Re}\,\lambda_2 + \mathrm{Re}\,\lambda_3 \geq \mathrm{Re}\,\lambda_1 \geq 0,\ \mathrm{Re}\,\lambda_3 + \mathrm{Re}\,\lambda_1 \geq \mathrm{Re}\,\lambda_2 \geq 0 \tag{7}$$

が成立することの必要十分条件は,

$$f(\mathrm{tr}\,A/2) \geq 0 \tag{8}$$

である (ただし, $f(x)$ は行列 A の固有値多項式 $f(x) = \det(x\mathbb{I}_3 - A)$).

式 (2) の行列 $[A_{ij}]$ の固有値実部は緩和定数 Γ であるから, 確率解釈に矛盾しないために非負であることが保証されている [14]. よって上補題を適用することができるので, 式 (7) が成立するためには $f(\mathrm{tr}\,A/2) \geq 0$ を示せばよい. 式 (2) の行列 $[A_{ij}]$ は直接計算により

$$\begin{aligned} f(\mathrm{tr}\,A/2) = \frac{1}{8}\Big[&(\gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_3)(\gamma_2 + \gamma_3 - \gamma_1)(\gamma_3 + \gamma_1 - \gamma_2) \\ &+ h_3^2(\gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_3) + h_1^2(\gamma_2 + \gamma_3 - \gamma_1) + h_2^2(\gamma_3 + \gamma_1 - \gamma_2)\Big] \end{aligned} \tag{9}$$

となるが, 完全正値性から課せられる式 (3) より明らかに非負である. よって, 式 (7) が成立する. この場合 $\mathrm{Re}\,\lambda_i = \Gamma_i$ であるために, これは目的の制約 (6) に他ならない.

3 結論と議論

本研究により, 緩和定数 (逆緩和時間) に対する制約 (6) は 2 準位系の完全正値力学的半群全てにおいて成立するものであることが明らかになった (定理 2). 本節ではこの結果が意味する意義について考察していく. まず, 素朴な推論から行なうと, この結果は Reduced Dynamics に対する実験的検証を与える可能性があるのではないかと考えられる. というのは, この制約は観測が可能な緩和定数 (またはその逆数の緩和時間) に対する関係式であるため, 原理的には実験によって確認をすることが可能であること, また, 2 準位系完全正値力学的半群 (または Lindblad 型マスター方程式) にとっての普遍則であることから, 完全正値力学的半群に対する実験検証の可能性を与える [15]. さらに, この制約は完全正値条件から課せられる条件 (3) に基づくものであることから, 完全正値性, ひいては Reduced Dynamics に対する実験検証を与えるものとも考えられる (事実, 完全正値条件を外した力学的半群では緩和時間にはこの制約は課せられない).

以上が素朴な推論であるが, このような一般論に基づく議論では, 何を仮定に置いているかを明確にする必要がある. そこで条件 (仮定) を整理しておくと, 完全正値力学的半群は, (i) 確率解釈, (ii) 線形性, (iii) 半群性, (iv) 完全正値性 (より正確には, 状態を密度空間 $\mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H}) \equiv \{\rho \in B(\mathcal{H}) \mid \mathrm{tr}\,\rho = 1, \rho \geq 0\}$ の元によって表し, 時間発展演算子を Λ_t とすると, (i)Λ_t が $\mathcal{T}_{1,+}(\mathcal{H})$ 上の超演算子であること (確率解釈), (ii)Λ_t の線形性, (iii)$\Lambda_t\Lambda_s = \Lambda_{s+t}$ $(t, s \geq 0)$(半群性), (iv)Λ_t が任意の時刻 t おいて完全正写像 [4] であること) によって構成されるものである [16]. また本稿の議論は, (v)2 準位系であることを挙げる必要がある. つまり制約 (6) は, 仮定 (i)-(v) の下で演繹される結論である. 確かにこの制約は (iv) 完全正値性条件を外すか外さないかによるものではあるが, 他の仮定の検証も同時に行なわなくてはならない. 特に, (iii) の半群性は, Markov 性が十分によい近似である系でしか正当化はされないであろう. もし半群の仮定が崩れるような系では, 行列の固有値実部で決める緩和時間の定義から検討をし直す必要がある. また, もっともらしい仮定である (i) 確率解釈に関しても議論の余地がある. これは「任意の初期時刻の密度行列 ρ は時刻 t において密度行列になる」という要請であるが, 必ずしも初期条件の任意性を課す必要性はないと考えることもできる. 事実, Štelmachovič と Buzěk [17] は, 対象系と環境系の所期相関がある場合の Reduced Dynamics では, 対象系の初期条件として要請されるのはその部分集合 (凸集合) であることを示している. さらに近年 Pechukas [18] は, 所期相関のある場合の Reduced Dynamics は必ずしも完全正値条件を満たす必要がないことを指摘した. Alicki [19] はその議論の条件を整理し, 適切な仮定をおけば所期相関のある場合の Reduced Dynamics でも完全正値性が必要となることをコメントしたが, この問題は現在もまだ解決していない (これらの考察は, 文献 [13] にて詳細に検討されているので, 参照していただきたい). 以上のことから, 制約 (6) が Reduced Dynamics に対する検証を与える可能性はまだ議論の余地が残されるが, これが完全正値力学的半群 (または Lindblad マスター方程式), 完全正値条件, また Reduced Dynamics にとって新たな知見を与えるものとなるのではないかと考えている.

有益な議論, コメントをしていただいた大場一郎教授, 中里弘道教授, Andrzej Kossakowski 教授, 田崎秀一教授, 今福健太郎博士に感謝を致します. また, 本研究を発表する場を与えてくださった有光敏彦教授をはじめとする主催者の方々, シンポジウムにおいて議論してくださった皆様に, 感謝致します.

参考文献

[1] C. W. Gardiner and P. Zoller, *Quantum Noise*, 2nd ed. (Springer-Verlag, Heidelberg, 2000).

[2] R. Alicki and K. Lendi, *Quantum Dynamical Semigroups and Application*, Lecture Notes in Physics Vol. 286 (Springer-Verlag, Berlin, 1987).

[3] 対象系の状態は, 全体系の状態を環境の自由度に渡って部分和を取ることにより得られる. このことは, 興味のある力学量 (もしくは観測する量) が $A \otimes \mathbb{I}_E$ の形をしたものに限定されることを意味する. ここで A は対象系の Hilbert 空間上の自己共役演算子 (オブザーバブル), $\mathbb{I}_E$ は環境系の Hilbert 空間上の単位演算子である.

[4] $B(\mathcal{H}_S)$ 上の写像 Φ は, $B(\mathcal{H}_S) \otimes M(n)$ 上の合成写像 $\Phi \otimes I_n$ が任意の自然数 n に対して正値保存的である場合, 完全正写像であると呼ばれる. ここで $B(\mathcal{H}_S)$ は Hilbert 空間 $\mathcal{H}_S$ 上の線形有界な演算子の集合, $M(n)$ は恒等写像 I_n を持つ $n \times n$ 複素行列空間を表している.

[5] K. Kraus, Ann. Phys. **64**, 311 (1971); *States, Effects, and Operations* (Springer-Verlag, Heidelberg, 1983).

[6] V. Gorini, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan, J. Math. Phys. **17**, 821 (1976); V. Gorini, A. Frigerio, M. Verri, A. Kossakowski, and E. C. G. Sudarshan, Rep. Math. Phys. **13**, 149 (1978).

[7] A. Kossakowski, Rep. Math. Phys **3**, 247 (1972); Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Math. Astr. Phys. **21**, 1021 (1972); R. S. Ingarden and A. Kossakowski, Ann. Phys. **89**, 451 (1975).

[8] G. Lindblad, Commun. Math. Phys. **48**, 119 (1976).

[9] Gorini *et al.* は任意の有限次元 Hilbert 空間において議論しているが, Lindblad は無限次元系の議論も行なっている.

[10] 複素行列 $[C_{ij}]$ は正値行列であるからエルミート行列でもある. よってある実直交行列 $[S_{ij}] \in SO(3)$ を用いて非対角成分を純虚数にすることが可能. この S を用いて新しい Pauli 行列の組 $F_i' \equiv \sum_j S_{ij} F_j$ とすれば, いつでもこのようなパラメータ表示が可能である.

[11] A. Kossakowski, Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Math. Astr. Phys. **21**, 649 (1973).

[12] G. Kimura, K. Yuasa, and K. Imafuku, quant-ph/0110150.

[13] G. Kimura, (in preparation); G. Kimura, (2001 年度物性研究修士論文に掲載予定).

[14] 直接非負性を証明することもできる. 例えば実 3×3 行列の固有値実部が非負であることの必要十分条件は $\mathrm{tr}\, A \geq 0, \mathrm{tr}\, \mathrm{adj}\, A \geq 0, \det A \geq 0$ であることが示される. (2) 式の行列 $[A_{ij}]$ がこれらを満たすことは, 直接計算によって確認できる.

[15] 例えば制約 (6) が成立しない現象が存在したとすると, それは完全正値力学的半群では説明がつかないことになる.

[16] 正確には連続性等の条件も加わるが, 詳細は文献 [6–8] を参照

[17] P. Štelmachovič and V. Bužek, Phys. Rev. A **64**, 062106 (2001).

[18] P. Pechukas, Phys. Rev. Lett. **73**, 1060 (1994).

[19] R. Alicki, Phys. Rev. Lett. **75**, 3020 (1995).